

## DA 型高分子半導体溶液薄膜における界面配向形成の MD 計算による検討

MD simulation study of DA-type semiconducting polymer thin-films

産総研<sup>1</sup>、東大<sup>2</sup> ○米谷 慎<sup>1</sup>、松岡悟志<sup>1</sup>、堤 潤也<sup>1</sup>、長谷川達生<sup>1,2</sup>AIST<sup>1</sup>, Univ. of Tokyo<sup>2</sup> ○Makoto Yoneya<sup>1</sup>, Satoshi Matsuoka<sup>1</sup>, Jun'ya Tsutsumi<sup>1</sup> andTatsuo Hasegawa<sup>1,2</sup>

E-mail: makoto-yoneya@aist.go.jp

はじめに：溶液プロセス形成による有機薄膜デバイスにおいて、薄膜中の有機半導体材料の界面配向はそのデバイス特性に大きな影響を有する。しかしながら、本質的に分子レベルスケールである界面の構造を、非平衡現象である薄膜形成過程の中でモニタすることが実験的に困難であることなどから、上記界面での配向形成の詳細については理解がすすんでいない。

本報告では、高キャリア移動度を示す DA 型高分子半導体として知られる PNTz4T<sup>1)</sup> (図 1) 溶液薄膜における界面での配向形成を、分子動力学 (MD) 計算により検討した結果を報告する。

計算方法:PNTz4T および溶媒 DCB<sup>1)</sup> を、general AMBER 力場を用いてモデル化し、電荷分布は B3LYP/6-31G(d) レベルの分子軌道計算による RESP 電荷を用いた。PNTz4T は八量体としてモデル化し、主鎖方向に周期境界条件を課して主鎖方向が揃った状態での残りの自由度の変化に着目したシミュレーションを行った。

検討結果：まず最初に、気-液界面における配向形成の検討を目的として、窒素雰囲気中の PNTz4T/DCB 溶液自己保持膜の MD 計算を行った。図 2 左に示すモデルは、紙面法線方向に主鎖を揃えた 30 本の PNTz4T 鎖 (青) を DCB 溶媒 (黄) 中にランダム配置して自己保持膜を形成したもので、これを初期構造として、80 °C、常圧条件にて MD 計算を行った。その結果、PNTz4T 分子は図 2 右に示す様に、気-液界面でその  $\pi$  共役平面を界面に概垂直としたいわゆる edge-on 配向した状態で  $\pi$ - $\pi$  スタッキングした構造に自発的に変化した。

次に、表面からの法線方向距離のみの関数で表されるモデル基板<sup>2)</sup> 界面での配向形成についても同様の MD 計算を行った。この結果については当日報告する。

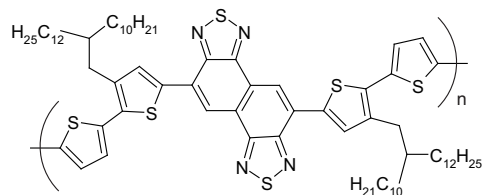


図 1 PNTz4T

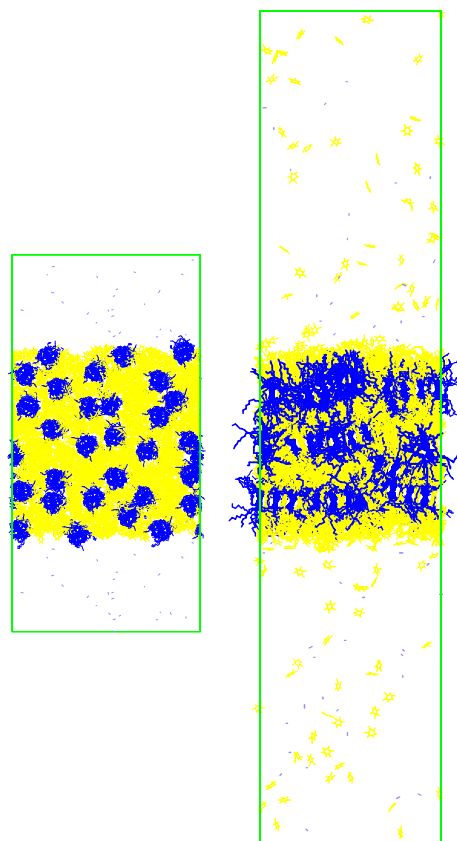


図 2 初期構造 (左)、MD 計算 50 ns 後のスナップショット (右) 緑枠は三次元周期境界

1) Osaka et al., JACS, **134**, 3498, 20122) Steele, Surf. Sci, **36**, 317, 1973